二重指数関数型積分法を利用した無限級数の計算(数値解析と科学計算)

平山, 弘

数理解析研究所講究録
717巻 1990年 15-28

二重指数関数型積分法を利用した無限級数の計算

神奈川工科大学　平山　弘(Hiroshi Hirayama)

1. はじめに

無限級数の和の数値計算は、おもに加速法[1][2]で計算されてきた。このような状況とは反対に、等比級数などn項までの和がnの関数で陽に表現できる単純な場合を除いて、解析的に厳密に計算できる級数は、複素関数論の留数定理の応用として求められる場合が多い。このような状況は、不定積分が存在しない定積分の計算と大変似ている。留数定理を利用して、具体的に無限級数の和を求める計算方法については、犬井・柳原[3]やHenrici[4]に詳しい。

Henrici[4]には、次のように無限級数を積分表示できることが示されている。(プラナ(Plana)の総和公式)

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n)=\frac{1}{2}f(0)+\int_0^{\infty} f(x)dx+i\int \frac{f(iy)-f(-iy)}{\exp(2\pi y)-1} dy \quad (1.1)$$

ここで、$f(x)$は解析関数である。これは、また次の様にも書

くこともできる[5]。

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n)=\frac{1}{2}f(0)+\int_0^{\infty} f(x)dx+\int \frac{-2\mathrm{Im}\ f(iy)}{\exp(2\pi y)-1} dy \quad (1.2)$$

この公式の右辺の積分を計算すれば、左辺の無限級数の和を求めることが出来る。

この様な試みは、Henrici[5]によって、プログラム可能な関数電卓の利用例として行われている。具体例として、オイラーの定数γやリーマンのゼータ関数$\zeta(s)$の計算などが行われている。この例では、2つある積分を解析的に(1.1)や(1.2)の第2番目の型の積分1個に変形し、それを台形公式で計算し、Romberg加速法によって積分値を求め、無限級数の値を得ている。

しかしながら、この積分表示を使う無限級数の計算法は、著者の知る限りHenriciのこの本だけであり、よく知られた方法とは言えない。この計算法が殆ど使われない理由として考えられるのは、(1.2)式の第二の積分の被積分関数の分子f(iy)の虚数部を解析的に計算しなければならない点にあると思われる。一般に数値解析では、計算の途中で解析計算が入るとプログラムが作りにくくなるため、暗黙の中に避ける傾向があり、解析計算を含む計算方法はよい方法とは考えない傾向があるためだと思われる。この計算方法では、複素数で計

算すれば、解析計算は避けることが出来るが、複素数の計算も計算時間がかかるためか、数値解析の理論ではよく使われるが実際の計算では、あまり使われていない。このような傾向が、この無限級数の計算法が使われない理由ではないかと思われる。

本論文では、(1.2)の左辺の積分に直接数値積分法を適用しその値を求めることによって、無限級数の和を求めることを試みた。ここで計算しなければならない積分が無限区間の積分であることから、このような積分に威力を発揮する二重指数関数型数値積分法を使った。複素数を含む計算はそのまま複素数で計算した。多くの関数では、f(iy)の虚数部を解析的に求めることは可能であるが、ガンマ関数などを含む場合、虚数部を表わす関数自体が定義されていないため、このような計算が無意味になるためである。

数値例として、SmithとFord[1]及び長田[2]で使われている収束の遅いテスト問題を計算した。この数値例から、この級数計算方法は加速法と比較して、非常に広い範囲の級数に対して適用でき、効率よく計算できることがわかる。

数値計算は、NECの数値演算プロセッサ付きのパーソナル・コンピュータPC-9801VX41上で行った。計算精度は、16桁弱、言語はMS-FORTRANを使用した。

2. 計算方法

2. 1 プラナ総和公式

プラナの総和公式(summation formula of Plana)[5]

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n)=\frac{1}{2}f(0)+\int_0^{\infty} f(x)dx+\int \frac{-2\mathrm{Im}\ f(iy)}{\exp(2\pi y)-1}dy \quad (2.1)$$

は、次の条件のもとで成り立つ。

(1) f(z)はRe z≧0で解析的である。

(2) $\sum_{k=0}^{\infty} f(n)$または$\int_0^{\infty} f(x)dx$が収束する。

(3) 有限なxに対して、一様に次の関係式が成り立つ。

$$\lim_{y\to\infty} |f(x\pm yi)|e^{-2\pi y} = 0$$

(4) x≧0に対して、次の積分が存在し、

$$\int_0^{\infty} |f(x\pm yi)|e^{-2\pi y}dy$$

x→∞のとき、0に収束する。

(1)の条件は、満たされない場合がよくあるが、この場合、平行移動によって、すなわち関数f(x)をf(x-p)に置き換えることによって、特異点をRe z<0の領域に移動させ、条件を満たすようにできることが多い。

(2.1)の式によって計算するのは、収束が非常に遅い級数を想定しているので、すなわち、f(z)は実軸方向の減衰が非常

にゆっくりしたものを考えているので、虚軸方向の変化も非常にゆっくりしたものになっている場合が多い。このため、(3)や(4)の条件は、考えている問題は、ほぼ満たすものと考えられる。事実、本論文であげた数値例では、この条件はすべて満たしている。

2．2 積分の計算

(2.1)の右辺に現われる積分は、無限区間の積分であり、その中の第一の積分は、仮定により非常に減衰が遅いので、何等か変数変換を行い、減衰を速くし数値積分を効率的に行う必要がある。この様な数値積分法として、二重指数関数型積分公式[6]がある。第二の積分は、被積分関数が指数関数的に減少するので、いろいろな数値積分法が考えられるが、第一の積分の計算法に合わせるために二重指数関数型を使う。

第一の積分は、変数変換

$$x=\sinh\left(\frac{\pi}{2}\sinh u\right) \tag{2.2}$$

によって、二重指数関数型に減衰する関数に変換し台形公式を使って計算する。第二の積分は、無限遠点において指数関数的に減衰するから、もう一重の減衰を与えるだけで十分だから、次のような変換を行う。

$$y=\exp(u-\exp(-u)) \qquad (2.3)$$

この変換によって、被積分関数は第一の積分と同様に二重指数関数的に減衰するので、台形公式によって、積分値を計算できる。

第二の積分の被積分関数の分母

$$g(y)=\exp(2\pi y)-1 \qquad (2.4)$$

は、$y=0$の近くで桁落ちを起こし、精度が著しく低下する。二重指数関数型数値積分公式では、積分区間の端点付近の値を多く使うので、この桁落ちが生じるので、精度低下が起こらないように対策をとる必要がある。計算機によっては、(2.4)に相当する関数が準備されている場合もあるが、一般には桁落ちしないように自作する必要がある。

台形公式による積分の計算は、始め、標本点間隔を1にして、正負両方向に計算を進める。被積分関数の値が非常に小さくなり、それまで計算した値に加えても、その値が変化しなくなるまで進める。標本点間隔を半分にし、同じように、計算を進める。この場合、前に計算した値は再利用するようにする。さらに、標本点間隔を半分にして、積分値を求める。このように、つぎつぎ計算を進め、前回の積分値と標本点間隔を半分にした今回の積分値の相対誤差が10^{-13}以下の時、計算を終了させる。3. の数値例はこの計算法で求めた値で

ある。

3. 数値例

ここで計算した例は、Smith and Ford[1]と長田[2]で使われている非常に収束が遅く、対数収束すると呼ばれる級数である。級数

$$S = \sum_{k=0}^{\infty} f(k) \qquad (3.1)$$

が対数収束するとは、部分和

$$S_n = \sum_{k=0}^{n} f(k) \qquad (3.2)$$

に対し、

$$\lim_{n \to \infty} \frac{S_{n+1} - S}{S_n - S} = 1 \qquad (3.3)$$

が満たすときを言う。

3. 1 対数収束級数

表1に8個の級数の計算例を示した。この問題は、Smith and Ford[1]と長田[8]が別の方法で計算している。NO.1からNO.4までとNO.7の例では、桁落ちを防ぐための対策をとらないで、この関数をそのまま記述することによって計算するこ

とができた。

NO.5とNO.6は、対数計算で桁落ちを生じるため、次のような関数を桁落ちしないようにプログラムし利用した。

$$h(x)=\log(1+x) \tag{3.4}$$

この関数を利用すると、NO.5およびNO.6は

$$\frac{1}{x} + \log\frac{x-1}{x} = \frac{1}{x} + h\left(-\frac{1}{x}\right) \tag{3.5}$$

$$\log\frac{x+1}{x}\ \log\frac{x+2}{x+1} = h\left(\frac{1}{x}\right)\ h\left(\frac{1}{x+1}\right) \tag{3.6}$$

となる。このようにしたとき、精度低下なしで計算できる。

NO.8の例は、二項係数とガンマ関数の関係式

$$(-1)^{n-1}\binom{-1/2}{n-1} = \frac{\Gamma(n-1/2)}{\sqrt{\pi}\ \Gamma(n)} \tag{3.7}$$

を利用して、複素数のガンマ関数から複素数の二項係数を計算した。複素数のガンマ関数のプログラムは、変数の実数部の値をガンマ関数の性質

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x) \tag{3.8}$$

を利用して、12以上にし、ガンマ関数の漸近展開式（スターリング（Stirling）の公式）を使い、(3.7)の式を計算するプログラムを作成した。これは、オーバーフロー・エラーを起こさせないためであったが、この計算の場合このような対策

は、不必要であった。

表 1

	f(k)	標本点1	標本点2	計算結果
1	K**(-2)	74	163	1.6449340668482265
2	(1+K**2+K**4)/(K**2*(1+K**4))	74	315	2.223411646515363
3	(2*K-1)/(K*(K+1)*(K+2))	141	167	0.7500000000000002
4	SIN(1/K)*LOG(COS(1/SQRT(K)))	74	163	-0.8520907541987282
5	1/K+LOG((K-1)/K)	74	163	0.57721566490153497
6	LOG((K+1)/K)*LOG((K+2)/(K+1))	74	163	0.68472478856315699
7	(K+EXP(1/K))**(-SQRT(2))	82	165	1.713796735540301
8	COMB(-1/2,K-1)*(-1)**(K+1)/(4*K-3)	153	164	1.31102877714606003

標本点1は第一の積分を計算するために必要な標本点数、標本点2は第二の積分を計算するために必要な標本点数である。

関数f(x)の式はFORTRANの記述方法を使った。関数はKの関数

であるが、K=X+1の関係がある。COMBは二項係数を求める関数である。これらの計算結果はすべて13桁以上の収束した場合、計算を打ち切っているので、計算精度は13桁以上一致しているものと思われる。厳密な値が分かっている級数とこの計算結果を比較すると、いずれも13桁以上一致することが確認できた。

3. 2 交代級数

Smithと Ford[1]、長田[7]で取り上げられている交代級数のテスト問題の場合について、計算を行った。計算は、2n-1項と2n項の和を求め新しい級数をつくりそれを計算した。すなわち

$$p(x)=f(2x-1)+f(2x) \tag{3.9}$$

とおいて、p(x)をつくり、それの和を求める。NO.9、NO.10はp(x)を計算した式をそのまま使えば問題なく計算できる。NO.12、NO.13の問題は、(3.7)と(3.8)の関係式を使えば、一つの式にまとめることができる。このまとめた式はNO.8と同様に計算を進めることができる。NO.11は、(2.4)と(3.4)の型の関数を使えば、精度の低下無しに計算することができる。

交代級数の数値計算結果を表2に示した。標本1、標本2、COMBなどは表1の場合と同じである。精度に関しても表1と

同じ様に１３桁以上の一致しているものと思われる。

表　２

	f(x)		
	標本点１	標本点２	計算結果
9	1/K*(-1)**(K+1)		
	74	162	0.6931471805599454
10	1/(2*K-1)*(-1)**(K+1)		
	141	162	0.7853981633974483
11	1/SQRT(K)*(-1)**(K+1)		
	80	86	0.6048986434216304
12	COMB(-1/2,K-1)/K		
	135	162	0.8284271247461903
13	COMB(-1/2,K-1)**2*(-1)**(K+1)		
	141	162	0.8346268416740731

また、長田[2]によって計算されている問題についても、同じように試みた。このテスト問題は、６題ありその内２題は上の問題と同じなので、残りの４題に対して試みた。その結果は表３に示した。表記法は、表１、表２と同じである。

表１、表２、表３からわかるように、標本点が最大で３００点程度で、ほぼ倍精度の計算の得られる最大の精度を得ることができる。この標本点数は、誤差評価を含めての標本点数であることを注意しなければならない。もし単に１３桁の

精度で得るだけならば、この半分の標本点の数で十分である。計算時間は、複素数のガンマ関数を使う計算が非常に長く、

表３

	f(x) 標本点１	標本点２	計算結果
14	1/K**3 69	162	1.202056903159594
15	1/K**1.5 80	163	2.612375348685489
16	1/K**1.5+1/K**2 80	163	4.257309415533715
17	LOG(K)/K**2 75	165	0.9375482543158437

８秒程度である。通常の計算時間は１秒以下である。今までの例からもわかる様に、単一の計算法で非常に多くの場合の級数の値が求められることがわかる。

４．　結論

ここでは、収束の遅い級数をプラナの総和公式によって、積分の形に変形し、その変換された積分を二重指数関数型数値積分法によって計算することによって、無限級数の和を求める方法を論じた。

この方法は、加速法と比較して、計算量が多くなる傾向があるが、非常に広い範囲の無限級数に対して、適用できることが分かる。

今後の課題としては、

（１）線形収束する級数和の計算

（２）二重指数関数型積分法で問題になる振動型無限級数の和の計算

等が考えられる。

5. 参考文献

[１] Smith,D.A. and Ford,W.F.:Acceleration of Linear and Logarithmic Convergence, SIAM J.Numer.Anal., Vol.16.No.2,pp.223-240

[２] Osada,N.:Asymptotic expansion and acceraration Methods for certain logarithmically convergent sequence,数理解析研究所講究録、Vol.676,1988,pp. 195-207

[３] 犬井・柳原：一般関数論（第３章、pp. 142-145）朝倉書店、1965

[４] Henrici,P.:Applied Computational Complex Analysis Vol.1 chapter 4,John Wiely & Sons, New York,1974

[５] Henrici,p.:Computational Analysis with the HP-25 Pocket Calculator, John Wiely & Sons,New York, 1977

一松信 訳：ポケット電卓による計算解析、現代数学社 1978

[６] 森 正武：数値解析と複素関数論 第７章、筑摩書房 1975

[７] 長田直樹：交代級数の漸近展開と加速法、情報処理学会論文誌、Vol.28,No.5,pp.431-436(1987)

[８] 長田直樹：対数収束級数の漸近展開と加速法、情報処理学会論文誌、Vol.29,No.3,pp.256-261(1988)